

4. félévi beszámoló
Veszeli Máté Tibor
(veszeli@caesar.elte.hu)
Fizika Doktori Iskola
Statisztikus Fizika, Biológiai Fizika és Kvantumrendszerek
Fizikája Doktori Program
Témavezető: Vattay Gábor

1. Kutatási tevékenység

Eddigi kutatásaim során kvantumszámítástechnikával és nyílt kvantumrendszerekkel foglalkoztam, valamint azzal az esettel, amikor a kettő összekapcsolódik, azaz a kvantumszámítógép kölcsönhat a környezetével.

Az első évben többek között befejeztem egy korábban elkezdett munkámat, ahol egy bites kvantumkaput vizsgáltam. A rendszer egy potenciálvölgybe bezárt elektron mágneses mezőben, amire külső, időben változó elektromos teret kapcsolunk. A kvantumbitet az elektron spinje reprezentálja. Mivel a rendszer szilárdtestben van, ezért a Hamilton-operátorban egy spindinamikát eredményező, nem elhanyagolható nagyságú spin-pálya kölcsönhatási tag is megjelenik. Arra a kérdésre kerestem a választ, hogy a paraméterek megválasztásával hogyan lehet minél gyorsabb kaput megvalósítani. Ennek fontossága nem csak abban rejlik, hogy minél gyorsabb kvantumszámítógépet kapjunk, hanem hogy a nemkívánatos dekoherenciát is megelőzzük. Elméleti számolásokat és számítógépes szimulációkat egyaránt végeztem. A témával kapcsolatban több analitikus eredmény született már, azonban ezek általában csak valamilyen perturbatív rezsimben alkalmazhatóak. Mozgó bázison dolgozva a paraméterek szélesebb tartományában vizsgálódtam, és azt kaptam, hogy bár a kétdimenziós számítási alteret az erős elektromos mező miatt elhagyjuk, oda mindig visszatérünk, így összességében egy mai korszerű kísérleti berendezéssel akár 3 nagyságrenddel gyorsabb kaput is létre tudunk hozni, mint amire korábban képesek voltak. A témából a Physical Review B újságban kétszerős cikkem jelent meg Pályi Andrással.

Az ELTE-s fizikus képzésben nem esik szó nyílt kvantumrendszerekről, ezért a kutatásomhoz szükséges tudást könyvekből és cikkekből szereztem meg. Mivel témavezetőm, Vattay Gábor oktatja a Nemegyensúlyi statisztikus fizika tárgyat (spnoneqf17em), ezért abban maradtunk, hogy kibővítjük a tárgyat, és kétszer másfél órát én beszélek az előbb említett témáról. A fő hangsúly a Redfield és Lindblad-egyenlet levezetésén van, majd ebből származtatjuk a Fermi-féle aranyszabályt. A témából jegyzetet készítettem, ami a http://veszeli.web.elte.hu/open_quantum_systems.pdf linken elérhető.

A kvantumszámítógépek egyik legjelentősebb típusa az adiabatikus kvantumszámítógép, mivel ennél már több ezer bites gépet is sikerült megépíteni. Ez az architektúra az adiabatikus tételre épít, ami szerint ha egy rendszer alapállapotban van, és a hozzája tartozó Hamilton-operátort lassan változtatjuk, akkor végig alapállapotban is marad. Ez a rendszer az Ising-moddal jellemezhető. Megvizsgáltam, hogy hogyan csatolódhat ez a rendszer a környezethez, és egy egyszerű master egyenletet sikerült levezetnem. Egy N spinből álló rendszerrel 2^N állapot van, így a master egyenlethez tartozó mátrix is $2^N \times 2^N$ méretű. Kis rendszereknél is már látszik, hogy létezik egy kritikus hőmérséklet, ami alatt kritikus lelassulás következik be, azaz a relaxációs idő $\tau_{\text{relax}} \propto \exp(-\beta\Delta)$. Ezt elméletileg is sikerült bebizonyítanom. Az uniform Ising modellhez leveztettem egy redukált egyenletet, ami csak $N+1$ változóval dolgozik, így nagy rendszereket is lehet vizsgálni. A numerikus eredmények azt mutatják, hogy a kritikus lelassulás valóban ott következik be, ahol az egyensúlyi statisztikus fizikában definiált kritikus hőmérséklet van. Szerettem volna meghatározni egy olyan hűtési sémát, aminek a segítségével a rendszert gyorsan alapállapotba lehet vinni, azonban a kidolgozott módszerrel csak a kritikus pont feletti résznél sikerült gyorsulást elérni, ami a teljes időhöz csak apró javulást eredményez.

Ismét csak a nyílt kvantumrendszerek egyenleteivel fehérjevezetést vizsgáltam. Téma-vezetőmmel, valamint Papp Eszterrel szerves makromolekulák vezetőképességét vizsgáltuk elméleti oldalról, és ehhez egy véges hőmérsékletű Landauer-Büttiker-formulát dolgoztunk ki. A témából publikáció készül.

Az utolsó téma, amivel jelenleg is foglalkozom egy fizikai jelenségre alapuló optimalizációs módszer kifejlesztése. Az elv hasonlít a szimulált hűtésre (simulated annealing), azonban itt az adiabatikus tételt használjuk fel. Ha egy rendszer alapállapotban van, és az időfüggő Hamilton-operátor lassan változik, akkor a folyamat végén is az alapállapotban maradunk. A rendszerünk a már jól ismert Heisenberg/Ising-modell. A teljes rendszert nem tudjuk szimulálni, mert túl magas dimenziós, így közelítésekre van szükség. Először átlagtér közelítést használtam. Ilyenkor a 2^N komplex változó helyett csak $2N$ változót figyelünk, azaz az eredeti

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{S}} c_{\mathbf{S}} |\mathbf{S}\rangle \quad (1)$$

helyett a

$$|\Phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^N \sum_{S=\pm 1} c_{i,S} |S\rangle \quad (2)$$

próbafüggvénnyel számolunk. Ezekre az együtthatókra egy időfüggő, nemlineáris Schrödinger-egyenletet lehet levezetni. Az egyenletet átírtam szögváltozókra, így kevesebb változóval kell számolni. A számolás akkor ad (az átlagtér közelítésen belül) jó eredményt, ha az a T idő, amíg a rendszert a kezdeti H_i -ből a végső H_f -be visszük nagy. A szimulációban emellett a dt integrálási időt kicsinek kell tartani, hogy a differenciál egyenlet numerikus megoldása korrekt legyen. Észrevettem, hogy valójában nincs szükség egy időfüggő Schrödinger-egyenletre, elég csak az energiával, mint funkcióval foglalkozni. Az $E(\{c_{i,S_i}\}; s)$ függvénynek kell minden $s \in [0, 1]$ -re minimálisnak lennie, ahol az $s = 0$ a kezdeti, $s = 1$ a végállapot. Ezzel a trükkkel sikeresen megszabadultunk a T paramétertől. Természetesen E -nek nagyon sok minimuma van, de $s = 0$ -ban tudjuk, hogy mi a kezdeti c_{i,S_i} , és kis ds lépésekben haladva mindig meg tudjuk találni a legközelebbi minimumot, így összességében egy $c_{i,S_i}(s)$ folytonos görbéhez jutunk, ami az $s = 1$ -et elérve megadja a kívánt megoldást. Szimulációk bizonyítják, hogy a két módszer ekvivalens. Utóbbi megközelítésnek az előnye, hogy túl lehet lépni az átlagtér közelítésen. Vethetünk több spinből álló csoportokat. Az energiát könnyen meg lehet határozni ilyenkor is, de egy időfüggő Schrödinger-egyenletet nehéz

lenne származtatni. Levezettem egy pusztán az energia deriváltjait tartalmazó differenciálegyenletet, aminek a megoldása megadja a $c(s)$ görbét. A módszer kis rendszerekre jól viselkedik, azonban nagyobbaknál numerikus szingularitás fordul elő. Ennek az oka, hogy a $c(s)$ görbe bár folytonos, de török, így a deriváltja szinguláris. Jelenleg azon dolgozom, hogy ezt megszüntessem.

2. Tanulmányi tevékenységek

2017/18 őszi:

- A káoszelmélet alkalmazása
- Infokommunikációs hálózatok modelljei
- Biológiai rendszerek statisztikus fizikája

2017/18 tavasz:

- Csapdába zárt atomi rendszerek I
- Környezeti áramlások fizikája
- Dinamikus kritikus jelenségek
- Rácstérelmélet I

2018/19 őszi:

- Rácstérelmélet II

2018/19 tavasz:

- Csapdába zárt atomi rendszerek II

3. Publikációk

Máté T. Veszeli, András Pályi - Fast electron spin flips via strong subcycle electric excitation (Phys. Rev. B)

doi: 10.1103/PhysRevB.97.235433,

4. Konferenciák, téli iskolák

- 2018. március 3-9. Information transmission in biological systems, Lengyelország, Poznan
- 2018. április 6. Statisztikus Fizika Nap
- 2018. április 14-15. Bolyai Konferencia
- 2019. február 17- március 1. Advanced School and Workshop on Ubiquitous Quantum Physics, Olaszország, Trieszt
- 2019. április 6-7. Bolyai Konferencia
- 2019. április 26. Statisztikus Fizika Nap
- 2019. május 30. HunQuTech Workshop

5. Oktatás

2017/18 tavasz:

- Nemegyensúlyi statisztikus fizika (2 darab előadás angolul)

2018/19 ősz:

- Számítógépes alapismeretek gyakorlat

2018/19 tavasz

- Statisztikus fizika A gyakorlat (harmadéves fizikusoknak)
- Nemegyensúlyi statisztikus fizika (2 darab előadás angolul)

6. Szakmai, közéleti tevékenység

BSc-s korom óta a Bolyai Kollégium belső tagja vagyok. A kollégium Felelős Rendszerében a Külügyi Tárca vezetését vállaltam el. Többször adtam elő szakszemináriumon, valamint szerveztem be előadót. Idén az új szakszeminárium-vezetők keresésében is nagy szerepet játszottam.